



TITLE:

3.棒状高分子の準濃厚溶液中におけるブラウン運動の計算機シミュレーション(東京都立大学大学院理学研究科物理学専攻,修士論文アブストラクト(1984年度))

AUTHOR(S):

山本, 泉

CITATION:

山本, 泉. 3.棒状高分子の準濃厚溶液中におけるブラウン運動の計算機シミュレーション(東京都立大学大学院理学研究科物理学専攻,修士論文アブストラクト(1984年度)). 物性研究 1985, 44(5): 807-807

ISSUE DATE:

1985-08-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/91788>

RIGHT:

襲うまでの動きが α -ファージ自身の力によるのではなく、鞭毛運動によって誘起された流れによって動くものであることが示される。

また, Beads Model を使った計算は, Higdon が複雑な積分方程式を数値計算したものよりはるかに簡単であり, しかも計算結果は, Higdon のと同程度であることから, ここに Beads Model の有効性が示される。

3. 棒状高分子の準濃厚溶液中における ブラウン運動の計算機シミュレーション

山 本 泉

高分子濃厚液体は低分子液体には見られないレオロジー的性質を示す。それは高分子鎖が互いに他を通り抜けられないという幾何学的制約(“絡み合い”)によると考えられている。この“絡み合い”を取り扱う理論として管模型理論がある。管模型理論は高分子濃厚系のマクロな性質を良く説明している。しかし, ミクロなレベルでの有効性については充分良くわかっていない。この有効性を検証するために幾つかのグループによって鎖状高分子濃厚系に対する計算機シミュレーションが行われている。そこでは固定された障害物中を高分子鎖が動く系については管模型理論を支持する結果が得られているが, 多数の高分子が同時に運動しているという現実の系に対する明確な結論は得られていない。また, 彼等のシミュレーションは高分子鎖を格子上で動かすもの又は斥力ポテンシャルを持たせたものであり, その様な複雑な状況から純粋な“絡み合い”の効果を区別することは困難である。以上の理由から我々は高分子を太さのない線とし, 厳密に線の交差を判断するシミュレーションを実行しようと考えた。だがこのようなシミュレーションは鎖状高分子ではその自由度が大きいことから困難である。

そこで本論文では自由度が小さい棒状高分子の準濃厚溶液に対するシミュレーションを行い“管模型”の有効性を検証した。その結果, (i)回転拡散は準濃厚溶液でも一つの回転拡散係数 D_r で記述できること(ii)高濃度では D_r は c^{-2} に比例すること(c は数濃度)を得た。この結果は管模型理論から予測される結果と一致している。